УДК 519.6

ПРО ОДИН АЛГОРИТМ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЧАСТКОВОЇ ПРОБЛЕМИ ВЛАСНИХ ЗНАЧЕНЬ НА ГІБРИДНИХ КОМП'ЮТЕРАХ

О. М. Хіміч*, чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., професор,*
О. В. Попов*, к.ф.-м.н., с.н.с.,*
О. В. Чистяков*, м.н.с.*
Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова НАН України
khimich_ic@mail.ru, alex50popov@gmail.com,
alexej.chystyakov@gmail.com

Розглядається алгебраїчна проблема власних значень (АПВЗ) для стрічкових симетричних додатно-означених матриць:

$$Ax = \lambda Bx, \quad A, B \in M^{n\times n}, \quad x \in C^n, \quad \lambda \in C, \tag{1}$$

де $M^{n\times n}$ – множина квадратних матриць порядку n.

Метод ітерацій на підпросторі є узагальненням методу обернених ітерацій і полягає в побудові послідовності підпросторів E_t (t = 1, 2, ...), яка зводиться до підпростору E_∞, що містить шукані власні вектори. В методі ітерацій на підпросторі на t-й ітерації обчислюється ортонормований базис підпростору E_t, а також, якщо досягнута збіжність, то визначаються шукані власні пари. Детальний опис методу представлено в [1].

Для розв'язування АПВЗ (1) методом ітерацій на підпросторі на багатоядерному комп'ютері (CPU) з графічними процесорами (GPU) використовується гібридний алгоритм. Розпаралелювання на CPU здійснюється в середовищі MPI, а на GPU – використовується технологія CUDA.

Елементи (головної діагоналі та піддіагональні) стрічкових симетричних матриць A та B розподіляються між процесами CPU за одновимірною блочно-циклічної схемою [3].

Оскільки операції на GPU виконуються в рамках MPI-процеса, розподіл даних аналогічний блочно-циклічній схемі.

Реалізація гібридного алгоритму методу ітерацій на підпросторі базується на факторизації (з використанням GPU) матриці A плитковим гібридним алгоритмом LL^T-розвинення [2].

На кожній ітерації виконуються наступні операції:

- розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь кожним процесом, використовуючи факторизовану матрицю:

$$AX_t = Y_{t-1}; \tag{2}$$

- обчислення проекції матриці A на підпростір E_t на GPU:

$$A_t = X_t^T Y_{t-1} \equiv X_t^T A X_t; \tag{3}$$

- обчислення прямокутної матриці (виконується з використанням GPU):

$$W_t = BX_t; \tag{4}$$

- обчислення проекції матриці B на підпростір E_t (виконується з використанням GPU):

$$B_t = X_t^T W_t \equiv X_t^T B X_t; \tag{5}$$

- розв'язування проблеми власних значень для проекцій (розв'язується кожним процесом незалежно):

$$A_t Z_t = B_t Z_t \Lambda_t; \tag{6}$$

- обчислення наступного наближення (операції виконуються паралельно на CPU):

$$Y_t = W_t Z_t; \tag{7}$$

- перевірка умов закінчення ітераційного процесу (аналогічно до кроку 6):

$$\frac{\left|\lambda_i^{(t)} - \lambda_i^{(t-1)}\right|}{\lambda_i^{(t)}} \le \varepsilon \quad (i = 1, 2, \ldots, r). \tag{8}$$

Якщо умова (8) виконуються після t ітерацій, то наближеним розв'язком задачі вважається:

$$\lambda_i^* = \lambda_i^{(t+1)}, \qquad X^* = X_{t+1} Z_{t+1} \quad (i = 1, 2, \ldots, r).$$

Тут, як і при перевірці умов закінчення ітераційного процесу, мається на увазі, що власні значення впорядковано за зростанням $0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \ldots \le \lambda_r \le \ldots$.

Результат роботи гібридного алгоритму – обчислені власні значення λ_i (розташовані у кожному процесі в порядку зростання) та розподілена між процесами у відповідності до розподілу матриць A та B матриця відповідних власних векторів.

<u>Апробація розробленого гібридного алгоритму</u> методу ітерацій на підпросторі та паралельного блочно-циклічного алгоритму [3] проводилася на персональному суперкомп'ютері гібридної архітектури (один обчислювальний вузол, два

процесори Xeon 5606, 2 GPU Tesla K40) для найменшого власного значення та відповідного власного вектора дискретних аналогів оператора Лапласа в прямокутниках, а саме:

задача 1 – n = 811 801, m = 901;
задача 2 – n = 1 002 001, m = 1 001;
задача 3 – n = 1 442 401, m = 1 201.

В результаті розв'язування цих задач гібридним алгоритмом методу ітерацій на підпросторі використовуючи один GPU було досягнуто прискорення в 6 – 8 рази у порівнянні з послідовною версією, а використовуючи 2 графічні прискорювачі отримано прискорення в 7 − 9 рази. Використовуючи гібридний алгоритм з одним GPU отримано прискорення в 1,25 рази порівнюючи з блочно-циклічним паралельним алгоритмом на восьми процесах, а при використанні двох GPU – в 1,4 раз.

Література

1. Молчанов И. Н., Попов А. В, Химич А. Н. Алгоритм решения частичной проблемы собственных значений для больших профильных матриц // Кибернетика и системный анализ. – 1992. – № 2. – С. 141 – 147.
2. Хіміч О. М., Баранов А. Ю. Гібридний алгоритм розв'язування лінійних систем зі стрічковими матрицями прямими методами. // Компьютерная математика. – 2013. – Вып. 2. – С. 80 – 87.
3. Химич А. Н., Молчанов И. Н., Попов А. В., Чистякова Т. В., Яковлев М. Ф. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. – Київ: Наук. думка, 2008. – 248 с.